Title	正規分布関数の計算とその周辺(数値解析の基礎理論とその周辺)
Author(s)	戸田, 英雄; 小野, 令美
Citation	数理解析研究所講究録 (1988), 676: 5-15
Issue Date	1988-12
URL	http://hdl.handle.net/2433/100976
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

数理解析研究所講究録
676巻 1988年 5-15

正規分布関数の計算とその周辺

千葉大学工学部　戸田　英雄　(Hideo Toda)
千葉大学工学部　小野　令美　(Harumi Ono)

1．まえおき

正規分布 N(0,1) の密度関数を

$$\phi(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(-\frac{1}{2}t^2), \quad -\infty < t < \infty$$

と書く．この上側確率を Q(x)

$$Q(x) \overset{d}{=} \int_x^{\infty}\phi(t)dt, \quad x \geqq 0$$

とする．この Q(x) の数値計算法については古くから多くの人々の，特にわが国では故山内二郎先生や一松先生の研究がある．これら従来の公式の検討とコンピュータ・プログラムに用いるときに注意すべきことを報告する．

2．$P(x) \overset{d}{=} \int_0^x \phi(t)dt$, $Q(x) \overset{d}{=} \int_x^{\infty}\phi(t)dt$ を求める従来の計算法

2.1 Williams・山内・一松の式

1) Williams (1946) の式

$$P(x) = \int_0^x \phi(t)dt = 1/2 - \int_x^{\infty}\phi(t)dt = 1/2 - Q(x)$$

について，

$$\{\frac{1}{2} - Q(x)\}^2 = \frac{1}{2\pi}\int_0^x\int_0^x \exp(-\frac{u^2+v^2}{2})du\,dv$$

$$\fallingdotseq \frac{2}{2\pi}\int_0^{\pi/4}\int_0^{2x/\sqrt{\pi}} \exp(-\frac{r^2}{2})r\,d\theta\,dr$$

$$= \frac{1}{4}\{1 - \exp(-\frac{2x^2}{\pi})\} \qquad (2.1)$$

$$Q(x)\cdot\{1-Q(x)\} \fallingdotseq \frac{1}{4}\exp(-\frac{2x^2}{\pi})$$

から，次の Williams の式が求められる．

$$Q(x) \fallingdotseq \frac{1}{2}\{1-\sqrt{1-\exp(-\frac{2x^2}{\pi})}\} \tag{2.2}$$

$$= \frac{1}{2}\cdot\frac{\exp(-2x^2/\pi)}{1+\sqrt{1-\exp(-2x^2/\pi)}} \tag{2.3}$$

誤差　$|E(x)| < 3.2\cdot 10^{-3}$

2) Williams・山内（1964）の式

$$\{\frac{1}{2} - Q(x)\}^2 = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/4}\int_0^{x\sec\theta}\exp(-\frac{r^2}{2})r\,d\theta\,dr \tag{2.4}$$

$$= \frac{1}{4} - \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/4}\exp(-\frac{x^2}{2}\sec^2\theta)d\theta$$

$$Q(x)\cdot\{1-Q(x)\} = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/4}\exp(-\frac{x^2}{2}\sec^2\theta)d\theta$$

$$= \frac{1}{\pi}\exp(-\frac{2x^2}{\pi})\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k(\frac{x^2}{2})^k\cdot\frac{a_k}{k!} \tag{2.5}$$

ここで，

$$\begin{cases} a_k = \int_0^{\pi/4}(\sec^2\theta - \frac{4}{\pi})^k d\theta \\ a_0 = \pi/4, \quad a_1 = 0, \quad a_2 = 4(\pi/3 - 1)/\pi, \cdots \end{cases} \tag{2.6}$$

$$Q(x)\cdot\{1-Q(x)\} \fallingdotseq \frac{1}{4}\exp(-\frac{2x^2}{\pi})\{1+\frac{2(\pi-3)}{3\pi^2}x^4\} \tag{2.7}$$

$$Q(x) \fallingdotseq \frac{1}{2}\left[1-\sqrt{1-\exp(-\frac{2x^2}{\pi})\{1+\frac{2(\pi-3)}{3\pi^2}x^4\}}\right] \tag{2.8}$$

誤差　$|E(x)| < 3.8\cdot 10^{-4}$

3) Williams・山内・一松の式

$$Q(x)\cdot\{1-Q(x)\} = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/4}\exp(-\frac{x^2}{2}\sec^2\theta)d\theta$$

$$= \frac{1}{\pi}\exp(-\frac{x^2}{2})\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k(\frac{x^2}{2})^k\cdot\frac{A_k}{k!} \tag{2.9}$$

ここで

$$\begin{cases} A_0 = \pi/4 \\ A_k = \int_0^{\pi/4}(\sec^2\theta - 1)^k d\theta = 1/(2k-1) - A_{k-1} \quad (k=1,2,\cdots) \end{cases} \qquad (2.10)$$

2.2 x が小さいとき P(x) を求める A 型公式

1) ϕ(t) の Maclaurin 展開の項別積分公式

$$P(x) = \int_0^x \phi(t)dt = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^x \exp(-\frac{1}{2}t^2)dt$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^x \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{1}{k!}\left(\frac{t^2}{2}\right)dt$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{1}{2^k k!}\cdot\frac{x^{2k+1}}{2k+1} \qquad (2.11)$$

2) P(x)/ϕ(x) の整級数展開公式

$$\exp(\frac{1}{2}x^2)\int_0^x \exp(-\frac{1}{2}t^2)dt$$

$$= \sum_{i=0}^{\infty}\frac{x^{2i}}{2^i i!}\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{1}{2^k k!}\cdot\frac{x^{2k+1}}{2k+1}$$

$$= x\sum_{i=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k x^{2i+2k}}{2^{i+k}\, i!\, k!(2k+1)} = x\sum_{r=0}^{\infty}\frac{x^{2r}}{2^r\cdot r!}\cdot\frac{(2r)!!}{(2r+1)!!} \qquad (2.12)$$

したがって

$$\exp(\frac{1}{2}x^2)\int_0^x \exp(-\frac{1}{2}t^2)dt = x\sum_{r=0}^{\infty}\frac{x^{2r}}{(2r+1)!!}$$

となる．これより

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^x \exp(-\frac{1}{2}t^2)dt$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left\{\exp(-\frac{1}{2}x^2)\cdot x\sum_{r=0}^{\infty}\frac{x^{2r}}{(2r+1)!!}\right\} = \phi(x)\cdot x\sum_{r=0}^{\infty}\frac{x^{2r}}{(2r+1)!!} \qquad (2.13)$$

3) $P(x)/\phi(x)$ の連分数展開公式（ Shenton (1954) ）

べき級数

$$\frac{P(x)}{\phi(x)\cdot x} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{x^{2r}}{(2r+1)!!} = 1 + \frac{x^2}{1\cdot 3} + \frac{x^4}{1\cdot 3\cdot 5} + \frac{x^6}{1\cdot 3\cdot 5\cdot 7} + \cdots$$

から Q.D. 表を作って P.Henrici の定理により次の連分数展開が求めれる

$$\sum_{r=0}^{\infty} \frac{x^{2r}}{(2r+1)!!} = \frac{1}{1+} \frac{-x^2/3}{1+} \frac{2x^2/(3\cdot 5)}{1+} \frac{-3x^2/(5\cdot 7)}{1+} \frac{4x^2/(7\cdot 9)}{1+} \cdots$$

$$= \frac{1}{1-} \frac{x^2}{3+} \frac{2x^2}{5-} \frac{3x^2}{7+} \frac{4x^2}{9-} \cdots$$

これより，Shenton の式が次のように導かれる．

$$P(x) = \phi(x)\cdot \left\{\frac{x}{1-} \frac{x^2}{3+} \frac{2x^2}{5-} \frac{3x^2}{7+} \frac{4x^2}{9-} \cdots\right\} \tag{2.14}$$

4) $\phi(x)$ の $t=x/2$ のまわりの展開の項別積分公式(Kerridge-Cook(1976))

$$\phi(t) = \phi\left(\frac{x}{2}\right) + \frac{(t-x/2)}{1!}\phi^{(1)}\left(\frac{x}{2}\right) + \cdots + \frac{(t-x/2)^r}{r!}\phi^{(r)}\left(\frac{x}{2}\right) + \cdots \tag{2.15}$$

を項別積分して

$$\int_0^{\infty} \phi(t)dt = 2\sum_{n=0}^{\infty} \phi^{(2n)}\left(\frac{x}{2}\right)\cdot\left(\frac{x}{2}\right)^{2n+1}\cdot\frac{1}{(2n+1)!} \tag{2.16}$$

が求められる．n 次の Hermite 多項式 $H_n(x)$ を用いて，

$$\theta_n(x) = \frac{x^n\ H_n(x)}{n!}$$

とおくと

$$P(x) = \int_0^{x} \phi(t)dt = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{8}\right) \sum_{n=0}^{\infty} H_{2n}\left(\frac{x}{2}\right) \frac{(x/2)^{2n+1}}{(2n+1)!}$$

$$= \frac{x}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{8}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \theta_{2n}\left(\frac{x}{2}\right) \frac{1}{2n+1} \tag{2.17}$$

となる．ここで，

$$H_{n+1}(x) = x\ H_n(x) - n\ H_{n-1}(x), \quad (n=1,2,\cdots) \tag{2.18}$$

から

$$\theta_0=1,\ \theta_{n+1}(x) = \frac{x^2\{\theta_n(x) - \theta_{n-1}(x)\}}{n+1}, \quad (n=1,2,\cdots) \tag{2.19}$$

を用いる．

２．３　x が大きいとき Q(x) を求める B 型公式

1) $Q(x) = \int_x^\infty \phi(t)dt$ の漸近展開

$$I_n \triangleq \int_x^\infty \frac{1}{t^n}\ \phi(t)dt = \frac{1}{x^{n+1}}\phi(x) - (n+1)I_{n+2}$$

を用いて

$$Q(x) = \frac{1}{x}\ \phi(x)\ \{1 - \frac{1}{x^2} + \frac{1\cdot 3}{x^4} - \frac{1\cdot 3\cdot 5}{x^6} + \cdots + (-1)^k\frac{(2k-1)!!}{x^{2k}}\}$$
$$+(-1)^{k+1}(2k+1)!!\int_x^\infty \frac{1}{t^{2k+2}}\ \phi(t)dt \tag{2.20}$$

2) 漸近展開の剰余項を級数展開して補正した公式（一松(1967) -1)

$$Q(x)= \frac{\phi(x)}{x}\sum_{n=0}^{N-1}\frac{(-1)^n(2n-1)!!}{x^{2n}} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\{\sqrt{\frac{\pi}{2}} - \psi_N(X)\} \tag{2.21}$$

ここで

$$\psi_N(X) = (2N-1)!!\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^{n-N}\ \frac{1}{2^n n!}\cdot\frac{X^{2n-2N+1}}{2n-2N+1} \tag{2.22}$$

(2.21) で N=0 の時は最初の項の和は 0 とし，このときの

$$\psi_0(X) = \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\ \frac{1}{2^n n!}\cdot\frac{X^{2n+1}}{2n+1}$$

は (2.11) と同等になる．

3) 漸近展開の剰余項の連分数展開による補正係数公式 (一松(1967) -2)

$$Q(x) = \frac{1}{x}\ \phi(x)\ \{1 - \frac{1!!}{x^2} + \frac{3!!}{x^4} - \frac{5!!}{x^6} + (-1)^{N-1}\frac{(2N-3)!!}{x^{2N-2}}\}$$

$$+ [\frac{1}{x}\ \phi(x)\frac{(-1)^N(2N-1)!!}{x^{2N}}\ \{1 - \frac{2N+1}{x^2} + \frac{(2N+1)(2N+3)}{x^4} - \cdots\}]$$

で [ ] を剰余項とする.

$$\{1 - \frac{2N+1}{x^2} + \frac{(2N+1)(2N+3)}{x^4} - + \cdots\} = \theta_N(X)$$

とおき Q.D. 法で連分数に変換すると

$$\theta_N(X) = \frac{1}{1} {}_{+} \frac{2N+1}{x^2} {}_{+} \frac{2}{1} {}_{+} \frac{2N+3}{x^2} {}_{+} \frac{2\cdot2}{1} {}_{+} \frac{2N+5}{x^2} {}_{+} \frac{2\cdot3}{1} {}_{+} \cdots \qquad (2.23)$$

となる. そこで

$$Q(x) = \frac{1}{x}\ \phi(x)\ \{1 - \frac{1!!}{x^2} + \frac{3!!}{x^4} - \frac{5!!}{x^6} + \cdots$$

$$+(-1)^N\ \frac{(2N-1)!!}{x^{2N}}\theta_N(X)\} \qquad (2.24)$$

絶対値最小の項に補正係数 $\theta_N(X)$ を掛けた公式である. (一松(1967)の式-2)

4) Q(x) の漸近展開の連分数表示公式 (Laplace (1805))

一松(1967)の式-2 で N=0 の場合に当たる. 即ち漸近展開を連分数表示したもの

$$Q(x) = \frac{1}{x}\ \phi(x)\cdot\theta_0(X)$$

$$= \phi(x)\ \{\frac{1}{x} {}_{+} \frac{1}{x} {}_{+} \frac{2}{x} {}_{+} \frac{3}{x} {}_{+} \frac{4}{x} {}_{+} \cdots\ \} \qquad (2.25)$$

が Laplace (1805) の式である.

3. コメント

3.1 x が大きいとき Q(x) を求める B 型公式の比較

いずれの公式でも桁落ちはない．停止則として 10^{-15} を用い 16 進 14 桁 15 切捨て方式で計算したときの手間を比較する．

一松(1967)-2 と Laplace(1805) の計算に必要な項数の比較を表 1 に示す．

表 1　一松(1967)-2 と Laplace(1805) の計算に必要な項数

x		3	4	5	6	7	8	9	10	11
一松	asymptotic series	4	8	12	18	24	32	22	17	15
(1967)-2	converging factor	45	27	17	10	6	2	0	0	0
Laplace (1805)		48	31	23	18	16	14	13	12	11

連分数を求めるのに漸化式を用いると 1 項求める手間は漸近級数の 1 項を求める手間のほぼ倍になり全体の手間としてはほぼ同じである．そこで，連分数を変形した場合の手間について調べる．

Laplace ：
$$\frac{1}{x+}\ \frac{1}{x+}\ \frac{2}{x+}\ \frac{3}{x+}\cdots+\frac{n}{x+}\cdots \tag{3.1}$$

一松(1967)-2 の修正項に用いられている形 ：
$$\frac{1}{x}\left[\frac{1}{1+}\ \frac{1}{x^2+}\ \frac{2}{1+}\ \frac{3}{x^2+}\ \frac{4}{1+}\cdots+\frac{2n-1}{x^2+}\ \frac{2n}{1+}\cdots\right] \tag{3.2}$$

(3.1) の縮合形 ：
$$\frac{x}{1+x^2-}\ \frac{1\cdot 2}{2+3+x^2-}\ \frac{3\cdot 4}{4+5+x^2-}\cdots-\frac{(2n-1)2n}{4n+1+x^2-}\cdots \tag{3.3}$$

(3.3) は (3.1),(3.2) の一つおきの近似分数を与える縮合形なので，項数は半分で済むが掛け算の手間が 1 回増す．この３公式の手間を比較する．掛け算と割り算の手間をそれぞれ M と D，(3.1) に必要な項数を k とする．

近似分数を次々に計算していく場合 ：

(3.1)： $(4M+1D)\cdot k$

(3.2)： $(6M+2D)\cdot k/2$　(2 項まとめて)

(3.3)： $(5M+1D)\cdot k/2$

項数を予め何らかの方法で決めておく場合

① 近似分数の分母分子を求め最後に 1 回割る

(3.1)： $4M\cdot k + 1D$

(3.2): 6M•k/2 + 1D

(3.3): 5M•k/2 + 1D

② 最後の項から割り算を実行していく場合

(3.1), (3.2): 1D•k

(3.3) : (1M+1D)•k/2

以上から，いずれの場合も縮合形の手間が少し少ないといえる．

3.2 x が小さいとき $Q(x)$ を求める A 型公式の比較

x が大きくなるにつれて，いずれの公式も桁落ちが起こる． 2.1 3) の williams•山内•一松の式では交項級数のための桁落ちで，2.2 の方式では $1/2 - P(x)$ の引算で起こる桁落ちである．2.1 3) の williams•山内•一松の式と 2.2 3) の Shenton の式及び 2.2 4) の Kerridge-Cook の式について，停止則として 10^{-15} を用い 16 進 14 桁 15 切捨て方式で計算したときの必要な項数と桁落ちを比較する．

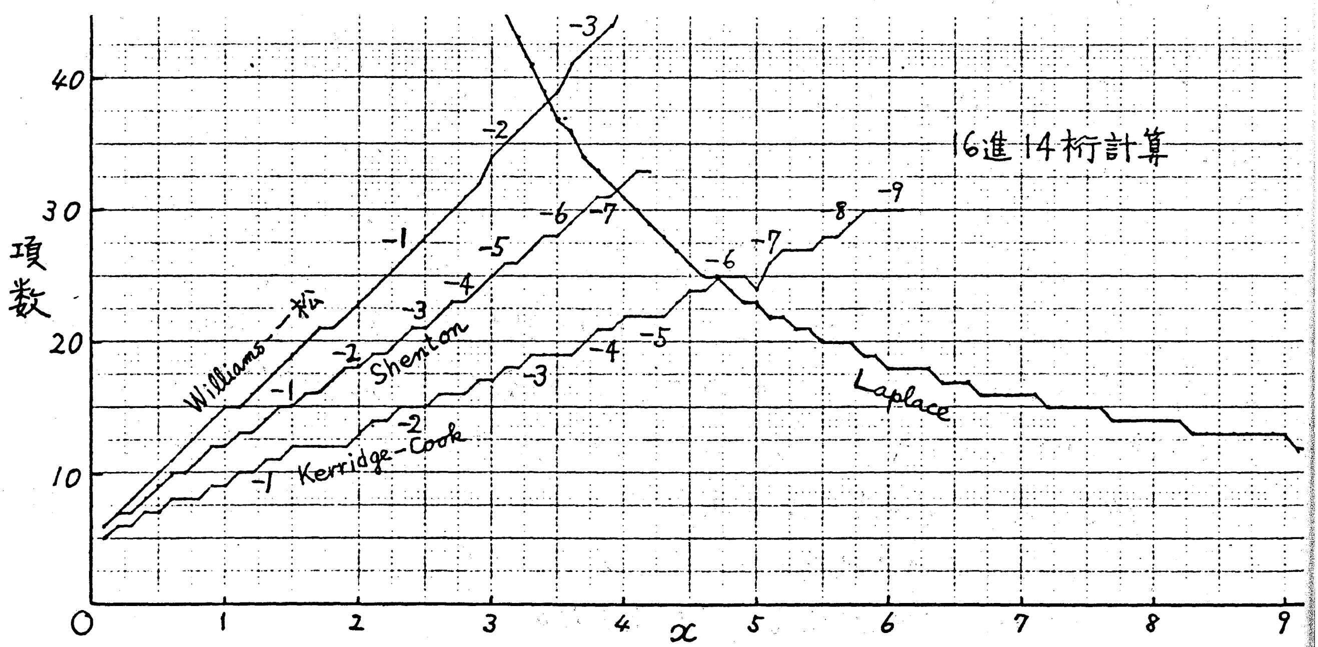

図1 必要な項数と落ちる桁数

Kerridge-Cook の公式は必要な項数の増す割合が最も小さく桁落ちも Shenton の公式よりは少ない． williams•山内•一松の公式は桁落ちが最も少な

く Laplace の公式を適用できる範囲までほぼカバーできる．また必要な項数は多いが，1項を求める手間は Kerridge-Cook より少し少ない．

3.3 公式の組合せ方とコメント

x の大きいところでは Laplace の縮合形を用いる．x の小さいところで用いる A 型公式を次のように選んで組み合わせる．

1）定数を使うことを許す場合

$0<x\leqq 2$ では Kerridge-Cook（$x=2$ のとき桁落ち約 2 桁）

$x\geqq 4$ では Laplace の縮合形

$2<x<4$ では Q(4) を定数として用意しておく．

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_x^4 \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right)dt + Q(4)$$

この積分を求めるのに $\exp(-t^2/2)$ を $(x+4)/2$ で展開し項別積分する．

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\cdot 2\cdot\frac{4-x}{2}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{4+x}{2}\right)^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\theta_{2n}}{2n+1} + Q(4) \qquad (3.4)$$

但し

$$\theta_0=1,\ \theta_1=\frac{4-x}{2}\cdot\frac{4+x}{2},\quad \theta_{n+1}=\frac{1}{n+1}\left(\frac{4-x}{2}\right)^2\left(\theta_n\frac{4+x}{4-x}-\theta_{n-1}\right)$$

1'）定数をたくさん使えば，項数はさらに減る

例えば Q(1),Q(2),…,Q(6) を用意する．

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_x^{[x]+1}\exp\left(-\frac{t^2}{2}\right)dt + Q([x]+1)$$

この積分を求めるのに $\exp(-t^2/2)$ を $(x+[x]+1)/2$ で展開し項別積分する．

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\cdot 2\cdot\frac{[x]+1+x}{2}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{[x]+1+x}{2}\right)^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\theta_{2n}}{2n+1}$$

但し

$$\theta_0=1,\ \theta_1=\frac{[x]+1-x}{2}\cdot\frac{[x]+1+x}{2},$$

$$\theta_{n+1}=\frac{1}{n+1}\left(\frac{[x]+1-x}{2}\right)^2\left(\theta_n\cdot\frac{[x]+1+x}{[x]+1-x}-\theta_{n-1}\right)$$

2) Williams·山内·一松の公式と Laplace の縮合形を組み合わせる

0＜x＜2.5 では Williams·山内·一松の公式 (x=2.5でも桁落ちはほとんどない)

x≧2.5 では Laplace の縮合形 (ただしマイコンで近似分数を漸化式で求めていく方式では Laplace の式で x<3 のとき overflow が起こって計算できないので，分ける点を 3 にする)

Williams·山内·一松の公式，Kerridge-Cook，(3.4) および Laplace の縮合形で必要な項数を図２に示す．

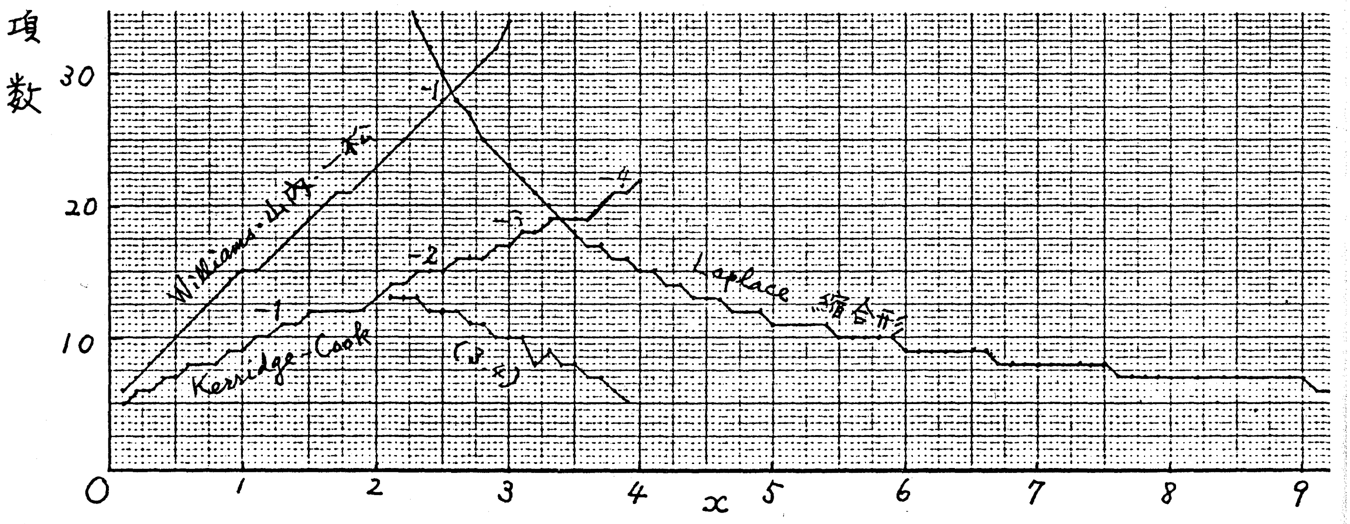

図２ Williams·山内·一松，Kerridge-Cook，(3.4)
および Laplace の縮合形で必要な項数

謝辞 森口繁一先生より連分数に関して懇切なるご教示をいただいた．ここに深甚なる謝意を表する

参 考 文 献

[1] Henrici,P.: Some Applications of the Quotient-Difference Algorithm, Proc. Symp. Appl. Math., 15, Amer. Math. Soc., pp.159-183, (1963).

[2] Hitotumatu,S.: On the Numerical Computation of Incomplete Gamma Function, Comm. Math., Univ. St. Paul. 15, pp.91-108, (1967).

[3] Kerridge,D.F. and Cook,G.W.: Yet Another Series for the Normal Integral, Biometrika, 63, 2, pp.401-403, (1976).

[4] Khovanskii,A.N.: The Application of Continued Fractions and Their Generalizations to Problems in Approximation Theory, translated by Peter Wynn, Noordhoff, (1963).

[5] Laplace,P.S.: Traite de Mecanique Celeste 4, Paris. (1805).

[6] 名古屋大学大型計算機センタ：ライブラリプログラム利用の手引（数値計算編），(1982).

[7] 日本規格協会：統計数値表 JSA-1972, (1972).

[8] Shenton,L.R.: Inequalities for the Normal Integral Including a New Continued Fraction, Biometrika, 41, pp.177-189, (1954).

[9] 柴田義貞：正規分布－特性と応用－，東京大学出版会，(1981).

[10] 戸田英雄・小野令美：正規分布関数の計算，京都大学数理解析研究所講究録 250, pp.36-50, (1975).

[11] 戸田英雄・小野令美： 2 次元正規分布関数の計算機用アルゴリズム，応用統計学，Vol.7, No.2, pp.43-58, (1978).

[12] 山内二郎：正規分布に関する近似関数，第５回プログラミングシンポジュウム報告集，N107-114，情報処理学会，(1964).

[13] 山内二郎・森口繁一・一松信：電子計算機のための数値計算法Ⅱ，培風館，(1972).